



## SIMULACIÓN NUMÉRICA DE CELDAS SOLARES DE GaAs \*

M. Barrera<sup>1</sup>, J. Plá<sup>1</sup>, F. Rubinelli<sup>2</sup>

<sup>1</sup>Grupo Energía Solar, CAC-CNEA, Av. General Paz 1499, 1650 San Martín, Provincia de Buenos Aires  
Consejo Nacional de Investigaciones Científicas y Técnicas (CONICET)  
Tel. (011) 6772-7128; e-mail [barrera@tandar.cnea.gov.ar](mailto:barrera@tandar.cnea.gov.ar)

<sup>2</sup>INTEC-CONICET, Universidad Nacional del Litoral, Güemes 3450, 3000 Santa Fe

**RESUMEN:** La provisión de energía eléctrica en los satélites está dada en casi la totalidad de los casos por sistemas fotovoltaicos, siendo las celdas solares el principal componente de dicho sistema, y el GaAs y el InGaP los materiales fotovoltaicos más importantes en aplicaciones espaciales. Dada la importancia que tienen este tipo de dispositivos se realizó la optimización y simulación numérica de una celda de GaAs mediante el código D-AMPS-1D. En este trabajo se detallan algunos de los parámetros necesarios para la simulación numérica, como los *offsets* de las bandas de valencia y de conducción en las interfaces, la movilidad de los portadores, la recombinación y el tiempo de vida media de los portadores y los índices de refracción complejos ( $n$ ,  $k$ ). Por último se muestran los parámetros eléctricos resultantes de la simulación realizada sobre un caso particular.

**Palabras clave:** celdas solares, GaAs, simulación numérica

### INTRODUCCIÓN

Las áreas de aplicación en el país de los productos de la ciencia y la tecnología espaciales más relevantes son: seguimiento y cuantificación de la producción agropecuaria y forestal, seguimiento y vigilancia de la actividad pesquera, prevención y supervisión de inundaciones y otros desastres naturales, evaluación y prospección de explotaciones del suelo y el subsuelo, y monitoreo y supervisión de problemas ambientales. Los beneficios sociales derivados de las actividades espaciales son numerosos y están relacionados con la información generada que, luego de procesada, es usada en la toma de decisiones por las autoridades o por los sectores productivos.

Las celdas solares para aplicaciones espaciales tienen requerimientos más estrictos que los dispositivos para usos terrestres tales como menor peso, mayor eficiencia, mayor confiabilidad y alta resistencia a la radiación. La provisión de energía eléctrica en los satélites está dada en casi la totalidad de los casos por sistemas fotovoltaicos, siendo las celdas solares el principal componente de dicho sistema, y el GaAs y el InGaP (y/o materiales ternarios asociados a este último) los materiales fotovoltaicos más importantes en aplicaciones espaciales. Como ejemplo de esta situación, se puede mencionar el diseño de las misiones SAOCOM (Satélites de Observación y Comunicaciones) y SAC-D (Satélite de Aplicaciones Científicas - D) de la CONAE (Comisión Nacional de Actividades Espaciales), en las que se definió el uso de celdas de triple juntura (GaInP<sub>2</sub>-GaAs-Ge) para la construcción de los módulos fotovoltaicos. Dicha construcción está a cargo de un grupo de trabajo creado especialmente en el Centro Atómico Constituyentes de la Comisión Nacional de Energía Atómica (CNEA) en torno al Grupo Energía Solar (GES) del Departamento de Física, para ejecutar el Subproyecto Paneles Solares de los Proyectos SAOCOM y SAC-D.

Considerando el consecuente interés que despiertan este tipo de dispositivos se iniciaron actividades conducentes a la optimización y simulación numérica de celdas solares basadas en materiales III-V mediante el código D-AMPS-1D (Analysis of Microelectronic and Photonic Devices- new Developments). Las actividades permitirán obtener conocimientos acerca del diseño y funcionamiento de este tipo de dispositivos que posibilitarán, a su vez, aportar soluciones a los problemas que se plantean en el diseño y ensayo de paneles solares para su utilización en satélites artificiales.

### CELDA SOLARES DE MATERIALES III-V: OPTIMIZACIÓN Y SIMULACIÓN NUMÉRICA

Las celdas solares de materiales III-V se obtienen a partir del crecimiento epitaxial de numerosas capas delgadas de diferentes semiconductores; un ejemplo de estas puede verse en la Fig.1.

---

\* Trabajo realizado en el marco del proyecto "Fabricación y caracterización de celdas solares para aplicaciones espaciales basadas en semiconductores III-V", MAE-SECyT (2006-2007) IT-PA05-E/X/037. Cuenta con financiamiento de CONAE, CNEA, CONICET (Proyecto PIP 2006-2007 N° 5286) y la ANPCyT a través del subsidio BID 1201/OC-AR, PICT2003 N° 10-14327.

Para mejorar las propiedades electrónicas de la superficie del dispositivo, se deposita sobre el emisor una capa llamada ventana cuya función es pasivar el GaAs a fin de reducir la recombinación superficial. En el caso de celdas de GaAs, los materiales que se utilizan habitualmente son el AlGaAs (DeSalvo y Barnett, 1993; Bube, 1998; Gillanders et al., 1991) y el InGaP (Luque y Hegedus, 2003).

En el presente trabajo se estudió una homojuntura de GaAs crecida mediante la técnica MOVPE (*Metal Organic Vapour Phase Epitaxy*) descrita en el trabajo de Bett et al. (1999) (Fig. 1).

AR			
ventana	InGaP	30nm	$p=3 \times 10^{18} \text{cm}^{-3}$
emisor	GaAs	500nm	$p=5 \times 10^{18} \text{cm}^{-3}$
base	GaAs	3 $\mu\text{m}$	$n=2 \times 10^{17} \text{cm}^{-3}$
BSF	InGaP	250nm	$n=3.5 \times 10^{18} \text{cm}^{-3}$
buffer	GaAs	200nm	$n=1 \times 10^{18} \text{cm}^{-3}$
sustrato	GaAs	350 $\mu\text{m}$	$n=3 \times 10^{18} \text{cm}^{-3}$

Figura 1 : Estructura de la celda solar de GaAs estudiada.

Dado que no se explicitaban los valores de los espesores de la doble capa antirreflectante  $\text{MgF}_2\text{-TiO}_2$  utilizada, se hicieron cálculos de optimización numérica a fin de determinarlos. Como resultado se obtuvieron espesores de 42,06 nm para el  $\text{TiO}_2$  y 97,27 nm para el  $\text{MgF}_2$  para lo que se consideró espectro AM1.5 (Plá et al., 2007). Los detalles acerca del procedimiento utilizado pueden verse en Plá et al. (2003) y Plá et al. (2006).

El comportamiento de la celda se estudió a través del programa de simulación D-AMPS-1D (Rubinelli et al., 2001; Vukadinovik et al., 2004). El código es una versión actualizada del programa unidimensional AMPS el cual fue desarrollado inicialmente en The Pennsylvania State University, University Park, EE.UU. durante los años 1988-1993 (McElheny et al., 1988). D-AMPS permite la caracterización de celdas solares de Si amorfo, microcristalino y cristalino. En su versión más reciente, motivada por el presente trabajo, permite simular celdas solares de materiales III-V, para lo que se incluyó la posibilidad de contar con los mecanismos de recombinación banda-banda (directa) y Auger. Permite evaluar la curva corriente-tensión ( $J$ - $V$ ) en condiciones de oscuridad e iluminación, la eficiencia cuántica, la reflectividad, el campo eléctrico, las concentraciones de portadores libres y atrapados, las corrientes de electrones y de huecos, las tasas de recombinación y de generación, etc.

Para poder comparar con los resultados experimentales del trabajo de Bett et al. (1999), se utilizó el espectro AM1.5 como iluminación incidente en la simulación numérica. Entre los parámetros que se tuvieron en cuenta para realizar las simulaciones se encuentran los *offsets* de las bandas de valencia y de conducción, la movilidad de los portadores, la recombinación y tiempo de vida media de los portadores e índices de refracción complejos ( $n$ ,  $k$ ). A continuación se muestran algunas de las características de dichos parámetros y el criterio utilizado para su selección.

### Diagrama de bandas

La energía de las bandas de valencia y de conducción presenta discontinuidades en la interfaz de una heteroestructura, debido a los diferentes valores de *gap*. Existen tres tipos de alineamiento de bandas (Schubert, 2005):

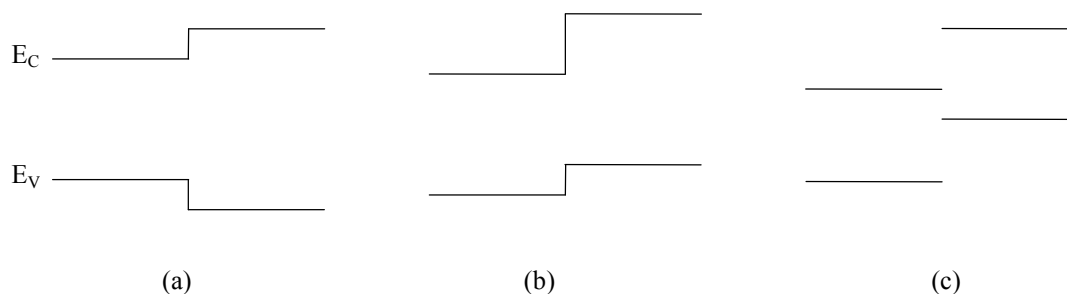


Figura 2: Tipos de alineamientos de la banda de energía: (a) tipo I o abierta, (b) tipo II o escalonadas, (c) tipo III o rota.

Según Luque y Hegedus (2003), las interfaces  $\text{Ga}_x\text{In}_{1-x}/\text{GaAs}$  y  $\text{Al}_x\text{In}_{1-x}\text{P}/\text{GaAs}$  son de tipo I. Los *offsets* utilizados son los del trabajo de Lee et al. (1992), habiéndose evaluado también la sensibilidad de la curva I-V respecto de estos parámetros. Como resultado se encontró una baja dependencia de los parámetros eléctricos simulados con respecto a los valores de *offset*.

Con respecto al *gap* del InGaP crecido mediante la técnica MOVPE, el mismo puede variar de acuerdo a las condiciones de crecimiento, temperatura y velocidad de crecimiento y presión parcial de fosfina, orientación del sustrato, etc. En particular esta dependencia se manifiesta de acuerdo al grado de orden de la estructura del compuesto III-V, es decir a qué sitios en la red ocupan los átomos de In y Ga (Luque y Hegedus, 2003). De esta manera se obtiene un InGaP perfectamente ordenado cuando se alternan los planos {111} de GaP e InP. Así, el *band gap* puede variar entre 1,8 eV, el cual corresponde a una estructura ordenada y 1.9 eV, el cual corresponde a una estructura desordenada.

Para la simulación de la celda de la Fig.1 se consideró  $E_g = 1,85$  eV, valor que corresponde a una estructura parcialmente ordenada.

### Movilidad

La movilidad de los portadores depende del material y del nivel de dopaje considerándose en este trabajo los valores presentados en el artículo de Ghanam et al. (2003). Para el GaAs, la movilidad de los huecos y los electrones están dadas por:

$$\mu_p = \frac{1}{0,0025 + 4 \cdot 10^{-21} N} \frac{\text{cm}^2}{V_s} \quad (1)$$

$$\mu_n = \frac{9400}{\left[1 + \frac{N}{10^{17}}\right]^{0,5}} \frac{\text{cm}^2}{V_s} \quad (2)$$

mientras que para el InGaP se considera a la movilidad de los huecos débilmente dependiente del dopaje  $N$ :

$$\mu_p = 40 \frac{\text{cm}^2}{V_s} \quad (3)$$

$$\mu_n = \frac{4000}{1 + \left(\frac{N}{10^{15}}\right)^{0,2}} \frac{\text{cm}^2}{V_s} \quad (4)$$

### Parámetros ópticos: $(n, k)$

El índice de refracción complejo  $(n, k)$  del GaAs fue extraído de Palik (1985) (Fig.3) mientras que el del InGaP de Schubert et al. (1995); en este último se describe un modelo refinado para determinar  $k$  cerca del *gap* (Fig.4). En ambas figuras puede observarse el incremento del coeficiente de extinción  $k$  a partir de  $h\nu = E_g$  que señala el umbral de absorción en los semiconductores.

La reflectividad calculada con estos índices se muestra en la Fig.5. También se muestran los resultados obtenidos con el código OPTICAL (Barrera y Plá, 2003; Centurioni, 2005). La diferencia que aparece a partir de los 900 nm se debe a que para los cálculos realizados con D-AMPS se consideraron todas las capas de la celda como coherentes mientras que para OPTICAL se consideró el caso mixto es decir, capas coherentes e incoherentes.

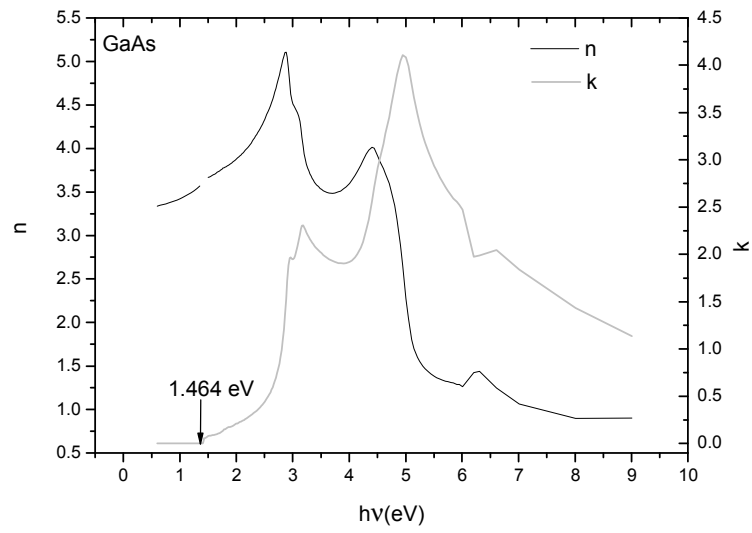


Figura 3: Índices del GaAs.

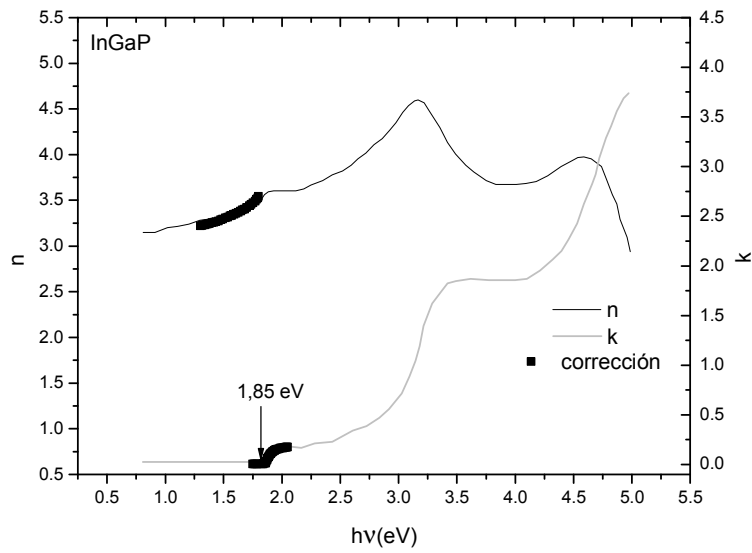


Figura 4: Índices del InGaP.

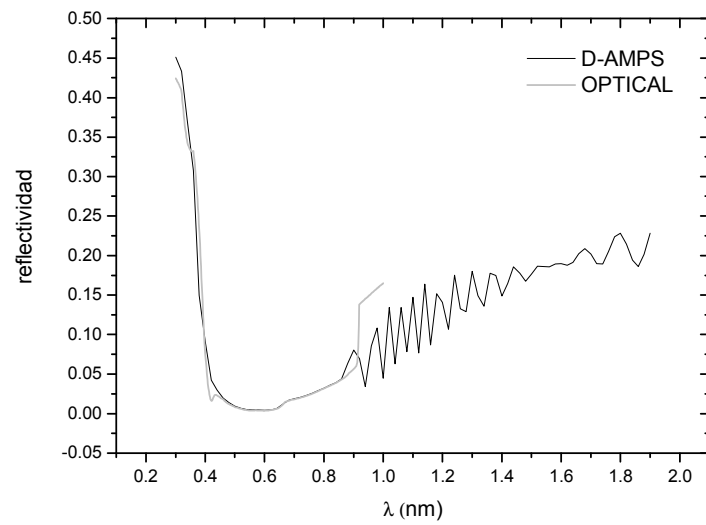


Figura 5: Reflectividad de la celda de GaAs.

## Recombinación

En el cálculo se incluyeron distintos procesos de recombinación: radiativa (recombinación directa) y no radiativas (Auger y Shockley-Read-Hall) (Fonash, 1981). La tasa de recombinación total es la suma de las recombinaciones debida a cada proceso (Luque y Hegedus, 2003):

$$R_{total} = R_{SRH} + R_{directa} + R_{Auger} \quad (5)$$

El tiempo de vida media  $\tau$  de los portadores minoritarios para un material dopado en condiciones de baja inyección puede escribirse como (Luque y Hegedus, 2003; Maaßdorf et al., 2002):

$$\frac{1}{\tau} = \frac{1}{\tau_{SRH}} + \frac{1}{\tau_{directa}} + \frac{1}{\tau_{Auger}} \quad (6)$$

En casi todos los materiales III-V el tipo de recombinación predominante es el de banda directa, y la misma puede expresarse como (Luque y Hegedus, 2003):

$$R_{directa} = B(pn - n_i^2) \quad (7)$$

donde  $B$  es el coeficiente de recombinación directa,  $p$  la concentración de huecos,  $n$  la concentración de electrones, y  $n_i$  la concentración intrínseca de portadores. Análogamente se representa la recombinación Auger mediante:

$$R_{Auger} = (\Lambda_n n + \Lambda_p p)(pn - n_i^2) \quad (8)$$

donde los coeficientes  $\Lambda_n$  y  $\Lambda_p$  dependen del material. En equilibrio térmico  $\Lambda_n = \Lambda_p$  (Fonash, 1981; Luque y Hegedus, 2003), el cual se denomina coeficiente de recombinación Auger.

D-AMPS admite dos posibilidades: introducir directamente el valor de  $\tau_{directa}$  para cada material o utilizar los coeficientes de recombinación directa y Auger. Para las simulaciones se utilizaron coeficientes de recombinación directa iguales a  $7,2 \cdot 10^{-10} \text{ cm}^3 \text{ s}^{-1}$  para el GaAs y  $1 \cdot 10^{-10} \text{ cm}^3 \text{ s}^{-1}$  para el InGaP (Levinshtein et al., 1999); mientras que el coeficiente de recombinación Auger fue  $1 \cdot 10^{-30} \text{ cm}^6 \text{ s}^{-1}$  para el GaAs y el InGaP (Levinshtein et al., 1999 y 2000).

Se comprobó que el tipo de recombinación predominante depende de la cantidad de defectos del material. En la Fig.3 pueden observarse los distintos tipos de recombinación calculados con D-AMPS, donde se puede observar que domina la recombinación directa; también se verificó la ecuación (5).

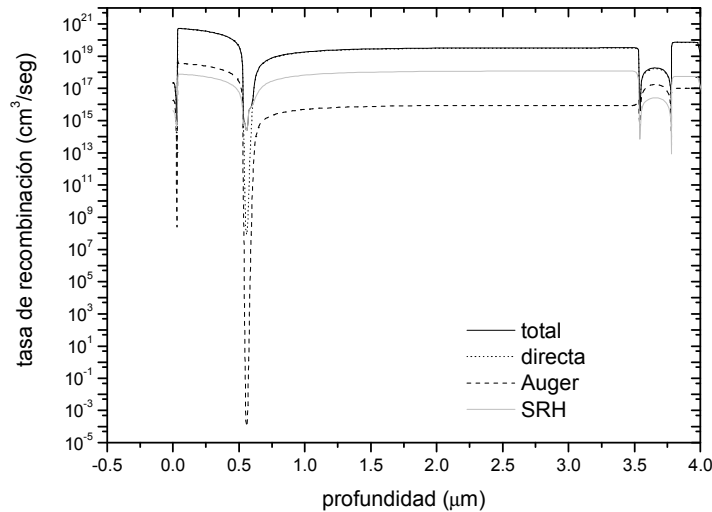


Figura 3: Distintos tipos de recombinación presentes en la celda solar simulada.

El valor de vida media calculado en la base es del orden de  $1.10^{-9}$  s, comparable con los encontrados en la literatura (Kinsel y Kudman, 1965; Maaßdorf et al., 2002).

## PARÁMETROS ELÉCTRICOS

Los parámetros eléctricos resultantes de la simulación son los que los que se muestran en la Tabla I.

<i>Parámetros</i>	$V_{ca}$ (mV)	$J_{cc}$ (mA/cm <sup>2</sup> )	$FF$ (%)	$\eta$ (%)
experimentales (Bett et al., 1999)	1035	26.7	84.3	23.3
simulados con D-AMPS	1039	26.4	88.1	24.1
simulados incluyendo $R_s$	1039	26.4	84.3	23.1

Tabla I. Parámetros eléctricos experimentales y simulados para una celda de GaAs

Se puede observar que la  $V_{ca}$  y la  $J_{cc}$  simuladas están en buen acuerdo con los valores experimentales mientras que la diferencia en  $FF$  se atribuye a las pérdidas óhmicas debidas a los contactos eléctricos del dispositivo real. El valor experimental de  $FF$  puede reproducirse si, utilizando el procedimiento descrito en Plá et al. (2003), se incluye una resistencia serie ( $R_s$ ) de  $0,062 \Omega\text{cm}^2$ .

Se realizaron ulteriores simulaciones que describen la situación en distintos escenarios. Uno de ellos es la variación del espesor de la capa ventana de InGaP, habiéndose considerado además su influencia sobre la optimización antirreflectante. Se consideró también la posible curvatura de bandas en la superficie frontal dada por la presencia de una alta densidad de defectos en dicha superficie, habiéndose habilitado además el transporte de huecos por efecto túnel en la interfaz InGaP/GaAs. Los resultados obtenidos fueron publicados en Plá et al. (2007).

## CONCLUSIONES

Se presentaron algunos de los parámetros que se tuvieron en cuenta para realizar la simulación numérica de celdas solares de GaAs con el código D-AMPS-1D: los *offsets* de las bandas de valencia y de conducción en las interfaces, la movilidad de los portadores, la recombinación y tiempo de vida media de los portadores índices de refracción complejos ( $n$ ,  $k$ ) característicos de los materiales III-V. Como resultado se obtuvieron los parámetros eléctricos simulados correspondientes a la estructura de un dispositivo real presentado en la literatura, los cuales muestran un buen acuerdo con los valores experimentales.

## REFERENCIAS

- Barrera M., Plá J. (2003). Películas dieléctricas antirreflectantes-pasivantes en celdas solares de silicio cristalino para uso espacial. Avances en Energías Renovables y Medio Ambiente 7, 09.07-09.12.
- Bett A.W., Dimroth F., Stollwerck G., Sulima. O.V. (1999). III-V compounds for solar cell applications. Applied Physics A 69, 119-129.
- Bube R.H. (1998). Series on Properties of Semiconductor Materials – Vol.1 Photovoltaic Materials, pp. 111-134, Imperial College Press, Singapur.
- Centurioni E. (2005). Generalized matrix method for calculation of internal light energy flux in mixed coherent and incoherent multilayer. Applied Optics 44, 7532-7539.
- DeSalvo G.C., Barnett A.M. (1993). Investigation of Alternative Window Materials for GaAs Solar Cells IEEE Transactions on Electron Devices 40, 705-711.
- Fonash S.J. (1981). Solar Cell Device Physics, pp. 6-68. Academic Press, EE.UU.
- Ghannam M., Poortmans J., Nijs J., Mertens R. (2003). Theoretical study of the impact of bulk and interface recombination on the performance of GaInP/GaAs/Ge triple junction tandem solar cells. Proceedings of the 3<sup>rd</sup> World Conference on Photovoltaic Energy Conversion, 666-669.
- Gillanders, M.S., Krut, D.D., Vijayakumar, P.S., Mason, A.V., Glenn, G.S., Lillington, D.R., Cavicchi, B.T., Yang, H.T., Ralph, R.K. (1991). Production and qualification status of GaAs/Ge top/bottom solar cells. Proceedings of the 22<sup>nd</sup> IEEE Photovoltaic Specialists Conference, 1469-1473.
- Kinsel T., Kudman I., (1965). Carrier recombination in gallium arsenide. Solid-State Electronics 8, 797-801.
- Levinshtein M., Rumyantsev S., Shur M. (ed.) (2000). Handbook Series on Semiconductor Parameters, pp. 77-103, Vol.1. World Scientific Publishing Company, Singapur.
- Levinshtein M., Rumyantsev S., Shur M. (ed.) (1999). Handbook Series on Semiconductor Parameters, pp. 37-61, Vol.2. World Scientific Publishing Company, Singapur.
- Luque A., Hegedus S.(ed.) (2003). Handbook of Photovoltaic Science and Engineering, pp. 359-411. John Wiley & Sons, Inglaterra.
- Maaßdorf A., Gramlich S., Richter E., Brunner F., Weyers M., Tränkle G., Tömm J.W., Mazur Y.I., Nickel D., Malyarchuk V., Günther T., Lienau Ch., Bärwolff A., Elsaesser T. (2002). Minority-carrier kinetics in heavily doped GaAs:C studied by transient photoluminescence. Journal of Applied Physics 91, 5072-5078.
- McElheny P.J., Arch J.K., Lin H.S. and Fonash S.J. (1988). Range of validity of the surface-photovoltage diffusion length measurement: a computer simulation. Journal of Applied Physics 64, 1254-1265.
- Palik E.D. (ed.) (1985) Handbook of Optical Constants of Solids, pp. 429-443, Academic Press, New York.
- Plá J., Tamasi M., Rizzoli R., Losurdo M., Centurioni E., Summonte C. and Rubinelli F. (2003). Optimization of ITO layers for heterojunction a-Si/c-Si solar cell applications. Thin Solid Films 425, 185-192.

- Plá J., Barrera M., Bosi M., Pelosi C., Attolini G., Rubinelli F., Fortin S., Martínez Bogado M.G. (2006). Colaboración italo-argentina para el estudio de celdas solares basadas en materiales III-V. *Avances en Energías Renovables y Medio Ambiente* 10, 04.61-04.66.
- Plá J., Barrera M., Rubinelli F. (2007). Influence of the InGaP window layer on the optical and electrical performance of GaAs solar cells. *Semiconductor Science and Technology* 22, 1122-1130.
- Rubinelli, F.A., Rath, J.K., Schropp, R.E.I. (2001). Microcrystalline *n-i-p* tunnel junction in *a*-Si:H/*a*-Si:H tandem cells. *Journal of Applied Physics* 89, 4010-4018.
- Schubert E.F. (2005). Physical Foundations of Solid-State Devices, <http://www.rpi.edu/~schubert/>
- Schubert M., Gottschalch V., Herzinger C.M., Yao H., Snyder P.G., Woollam J.A. (1995). Optical constants of  $\text{Ga}_x\text{In}_{1-x}\text{P}$  lattice matched to GaAs *Journal of Applied Physics* 77, 3416-3419.
- Vukadinovic M., Smole F., Topic M., Schropp R.E.I. and Rubinelli F.A. (2004). Transport in tunnelling recombination junctions, a combined computer simulation study. *Journal of Applied Physics* 96, 7289-7299.

**ABSTRACT:** The power supply in satellites in most cases is given by photovoltaic systems, being the solar cells the main component of such system and GaAs and InGaP the more important materials in space applications. Given the importance gained by these type of devices the optimization and numerical simulation of GaAs solar cells was performed by using the D-AMPS-1D code. In this work, some of the parameters necessary for the simulations as interface bands offsets, carrier mobilities, recombination parameters and lifetime of carriers, and complex refraction indexes ( $n$ ,  $k$ ) are detailed. Finally, electrical parameters obtained for a particular case are showed.